

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЕРХГЛУБОКОГО ПРОНИКНОВЕНИЯ ВЕЩЕСТВА ПРИ РАДИАЦИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ МАТЕРИАЛОВ

Маркидонов А.В.

Филиал Кузбасского государственного университета имени Т.Ф. Горбачева
в г. Новокузнецке, г. Новокузнецк
markidonov_artem@mail.ru

Наиболее распространенным методом модификации как полупроводниковых, так и металлических материалов является радиационное облучение, и в частности ионная имплантация. Наличие эффекта дальнего действия, обнаруженного в 60-г XX в., значительно расширяет границы применения технологических процессов имплантирования, так как в противном случае невозможно было бы добиться глубокого проникновения ионов.

Ограниченность практического использования эффекта дальнего действия заключается в отсутствии полного объяснения данного явления, и даже существуют работы, подвергающие его сомнению [1]. Наиболее широкие дискуссии разворачиваются по поводу причастности к сверхглубокому проникновению радиационного фронта ударных волн, зарождающихся в момент образования термического пика, возникающего из-за локального перегрева области в которой образуется каскад атомных смещений [2]. С одной стороны, сама по себе волна затухает достаточно быстро, и объяснить с ее помощью «эффект дальнего действия» на расстоянии в несколько сотен микрометров не представляется возможным. Но с другой стороны, ни что не мешает данной волне инициировать различные внутренние механизмы. Так встречая на своем пути протяженные дефекты (например, дефекты упаковки), волна вызывает их перестройку, которая и сопровождается испусканием вторичных волн [3].

Поэтому более детальное изучение механизмов зарождения, распространения и трансформаций послекаскадных волн в материалах позволит более глубоко понять процесс, имеющий огромное практическое значение. В связи с тем, что подобные процессы отличает высокая скорость протекания и малые размеры исследуемых областей, то наиболее актуальным в данном случае является использование методов компьютерного моделирования.

В настоящей работе исследование проводилось по методу молекулярной динамики. Взаимодействие между атомами описывалось парным потенциалом Морзе.

При радиационном облучении в избытке образуются точечные дефекты, часть из которых аннигилирует. При встрече волны с кластерами

межузельных атомов образуются краудионные комплексы. Подобные комплексы образуются не только после прохождения через структуру ударной волны, но и при релаксации кристалла, пересыщенного межузельными атомами. Однако ударная волна вызывает образование в том числе и малых краудионных комплексов, которые не всегда образуются в процессе релаксации (см. рис. 1).

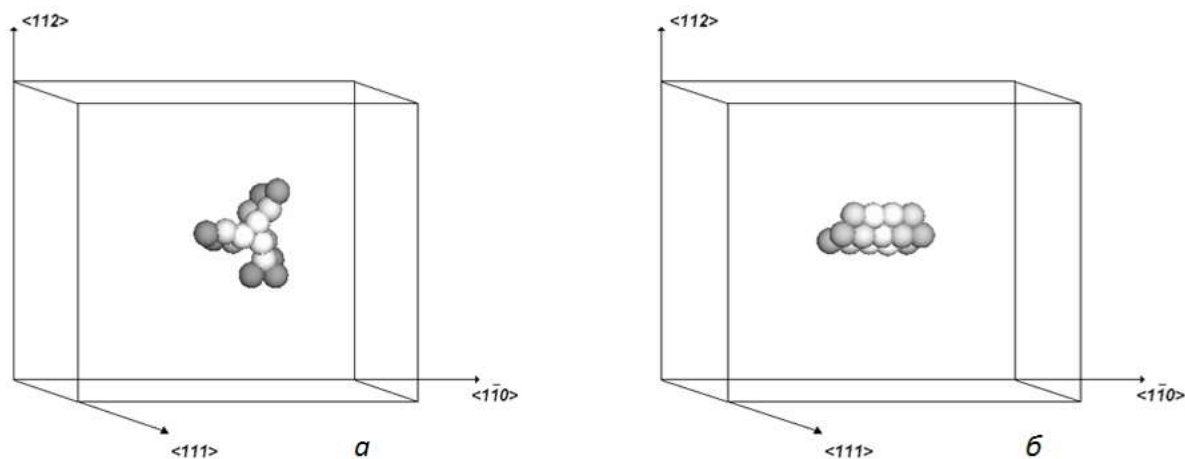


Рис.1. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент) содержащем комплекс из трех межузельных атомов после релаксации структуры в течение 10 пс (а), и после прохождения ударной волны (б). Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.82 \dots -2.53$ эВ (а) и $-3.82 \dots -2.64$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ).

Одиночный краудион является достаточно подвижным, так как потенциальный барьер, разделяющий равновесные положения дефекта, не высок. Прохождение продольной волны вызывает его дрейф вдоль плотноупакованного направления кристалла, но через некоторое время образуется гантельная конфигурация, и межузельный атом остается внутри решетки. Краудионные комплексы, образующиеся при агрегатизации группы межузельных атомов, являются более устойчивыми конфигурациями, и могут перемещаться на гораздо большие расстояния. Возможно, при определенных условиях они могут легко достигать естественных стоков точечных дефектов.

Воздействие волны на уже сформировавшийся комплекс вызывает смещение последнего. При этом если комплекс ориентирован под углом к направлению распространения волны, то она вызывает его переориентацию. Необходимо отметить, что для осуществления данной трансформации волна должна иметь скорость равной как минимум скорости звука.

Таким образом, несколько продольных волн могут вызывать перемещения краудионных комплексов на значительные расстояния в независимости от их ориентации в кристалле.

Большинство кристаллических веществ, используемых в различных отраслях промышленности, являются поликристаллическими материалами. Границы зерен являются неотъемлемыми структурными составляющими поликристаллов и принимают непосредственное участие в формировании их физико-механических свойств. Поэтому необходимо пронаблюдать, как поведет себя краудионный комплекс в поликристалле, так как известно, что границы зерен являются естественными стоками точечных дефектов.

Прохождение краудионного комплекса через зернограничную область приводит к потерям кинетической энергии. Диссипация энергии осуществляется благодаря порождению краудионами вторичных продольных волн, распространяющихся в кристалле предположительно со скоростью звука. Подобные вторичные волны могут приводить в движение следующую группу краудионов, и процесс повторяется.

Таким образом, подводя итог проделанной работы можно сказать, что существует возможность, даже при низкоэнергетическом воздействии на материал, не разрушая его структуру, целенаправленно влиять на процесс формирования и последующий отжиг дефектов, что, возможно, найдет свое применение при создании материалов с заранее заданными свойствами.

Список используемой литературы:

1. Бахарев О.Г., Погребняк А.Д., Базыль Е.А., Соколов С.В. Исследование эффекта дальнего действия при высокодозной ионной имплантации в металлы // Металлофизика и новейшие технологии. 1999. т.21. №8. С.61 – 70
2. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук. 2008. т.178. №9. С. 991 - 1001.
3. Тетельбаум Д.И., Баянкин В.Я. Эффект дальнего действия // Природа. 2005. №4. С. 9 - 17.